数理解析研究所講究録
第 880 巻 1994 年 53-58

オペレータ係数法について

慶應義塾大学理工学部　野寺 隆 (Nodera Takashi)

概要

非対称行列系の線形方程式を解く反復解法は, 様々なものがある. 近年, 多くの研究者によって利用されている一般共役勾配法系の反復解法の中で, オペレータ係数法 (Operator Coefficient Method) と呼ばれる手法について概観することにする. この手法を用いると勾配法系の反復解法の収束を加速することが可能である.

1 はじめに

移流拡散方程式の境界値問題などを離散近似すると大規模な連立 1 次方程式

$$Ax = b \tag{1}$$

が得られる. ただし, 係数行列 A は非対称行列となることがある. 通常, このような方程式は, 反復法を利用して解を求めることが多い. 近年, 行列の前処理の研究が進み, 非対称行列系の大型の線形方程式に対しても共役勾配法系の解法を利用して解を求めることが多く試みられている. それらの解法の中には, 一般共役残差法 (Generalized Conjugate Residual Method), ORTHOMIN(m) 法, Minimum Residual 法 (CR(m) 法とも言われることがある) [4, 7, 8], Gmres(k) 法 (Restarted Generalized Minimum Residual Method) [10] などや, 近年我が国でも研究が進められている双共役勾配法 (Bi-Conjugate Gradient 法) の系列のものがある ([13, 14, 9]).

本稿では, 共役残差法の系列の算法を利用して, より速い収束性を持つ算法のクラスを構成することを考える.

2 オペレータ係数法

一言でオペレータ係数法 (OC 法) のことを述べるとすると, 反復公式に用いる漸化式の階数の高い m による ORTHOMIN(m) 法と, 反復漸化式の階数は 1 であるが繰り返し反復をスタートする (通常, これをリスタートと呼んでいる) GCR($k-1$)/GMRES(k) 法をミックスした解法である.

共役勾配法や共役残差法の算法を解析すると, 下記の表のようなベクトル列を生成する. ORTHOMIN(m) 法の算法はこの表の行を, GCR($k-1$)/GMRES(k) 法の算法はこの表の列を埋めることになる.

$$
\begin{array}{c|cccc}
x_n & x_{n-1} & x_{n-2} & \cdots & x_{n-m} \\ \cline{2-5}
r_n & & & & \\
Ar_n & & & & \\
\vdots & & & & \\
A^{k-1}r_n & & & &
\end{array}
$$

ORTHOMIN(m) 法は, 階数の高い m を取ることにより, 近似解を構成するためのより多くの情報を含むベクトルが利用可能になる. 同様に, GCR($k-1$)/GMRES(k) は, リスタートを頻繁に行うことにより丸め誤差や打ち切り誤差による情報の伝達ロスを最小限に押さえていると言える. よって, 下記のようなベクトルを構成することができれば, 効果的な収束をする算法を構成することができると思われる.

$$
\begin{array}{c|cccc}
x_n & x_{n-1} & x_{n-2} & \cdots & x_{n-m} \\ \cline{2-5}
r_n & r_{n-1} & r_{n-2} & \cdots & r_{n-m} \\
Ar_n & Ar_{n-1} & Ar_{n-2} & \cdots & Ar_{n-m} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
A^{k-1}r_n & A^{k-1}r_{n-1} & A^{k-1}r_{n-2} & \cdots & A^{k-1}r_{n-m}
\end{array}
$$

次のような算法を構成することができればよいことになる.

[OC(k, m) 法]

初期値 x_0 を選択し, 近似解 x_n は

$$\text{minimize } \|r_n\|_?,$$

(ただし, $r_n = b - Ax_n$ は残差ベクトルである.)

$$
\operatorname{span}\left\{
\begin{array}{cccc}
x_{n-1} & x_{n-2} & \cdots & x_{n-m} \\
r_{n-1} & r_{n-2} & \cdots & r_{n-m} \\
Ar_{n-1} & Ar_{n-2} & \cdots & Ar_{n-m} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
A^{k-1}r_{n-1} & A^{k-1}r_{n-2} & \cdots & A^{k-1}r_{n-m}
\end{array}
\right\} \tag{2}
$$

を満足するように決定する. また, 同次 (homogeneous) の場合には, x_iの係数の和が 1 になるように x_nを選ぶ.

前述のように OC(k, m) 法を定義したが, ここでこの方法につて知る必要があるいくつかの性質について述べることにする.

- 近似解 x_n を構成するのに前述の (2) 式に含まれるすべてのベクトルは必要ではない (例えば, ORTHOMIN(m) 法など).
- ベクトルの選択に関して, 特別の選択条件はない. 選択の可能性は無数に存在する.

- m 階の反復公式を用いるとすると, m 個の初期値 (x_0, x_{-1}, x_{-2}, ..., x_{1-m}) から始めることになる. このような場合には, OC 法は Krylov 空間法とは言えないことになる.

しかし, OC 法の中には我々が現在利用している反復解法のいくつかを含んでいる. 例えば, 共役勾配法 (Conjugate Gtadient Method) や共役残差法 (Conjugate Residual Method) はさまざまなノルムを最小にし, つねに選択空間の中で最新の残差のみを持つ同時な OC(1,2) 法ということができる. GCR($k-1$)/GMRES(k) 法は残差ベクトルのユークリッド・ノルムを最小にする同時な OC(k,1) 法である. ORTTHOMIN(m) 法は, 残差ベクトルのユークリッド・ノルムを最小にし, つねに選択空間の中で最新の残差ベクトルを持つ同時な OC($1, m-1$) 法である.

前述の表の $(k+1)\times m$ 個のベクトルを使用する算法は, ある決った精度で方程式の解を求めるに必要な行列とベクトルとの積の演算を大幅に減少させる. 例えば, ORTHOMIN(m) 法の収束性は, 一般的に反復公式の階数 m を増加することにより改善する可能性がある. ORTHOMIN(m) 法は, 次数 1 ($k=1$) の方法であり, 次数が高い ($k>1$) ときにも次数 1 の場合と同様に収束性の改善を期待できると考えられる. 例えば, 次数 k の値を固定して, 階数 m の値を変化させると, 図 1 のような収束結果が得られることになるからだである. ただし, この数値例は, Elman [5] の例題を利用して計算したものである.

この場合には, 各反復における行列とベクトルの積の演算量は, 階数 m に関係なく, GCR($k-1$)/GMRES(k) 法のものに等しいことになる. よって, 各反復で同じ行列とベクトルの積の演算を行なわねばならないが, その収束性は最小化問題を解くことにより加速することができる. ここで「解法が速い収束をする」とは, 反復回数が少ない解法であり, 結局の所, 算法を継続するために必要となる行列とベクトルとの積の演算量が少ないことになる.

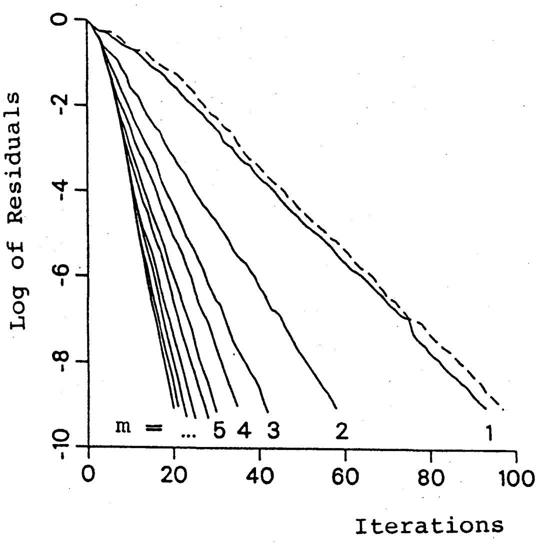

図 1 GCR(5)/GMRES(6) 法 (点線) および OC(6,m) 法 ($m=1,2,3,\ldots,10$. 実線) の収束性

OC 法では, いくつかの漸化式を利用することが可能である. 例えば,

$$\text{minimize } \|r_n\|_?$$

が係数

$$\begin{array}{cccc} c_{(0,1)} & c_{(0,2)} & \cdots & c_{(0,m)} \\ c_{(1,1)} & c_{(1,2)} & \cdots & c_{(1,m)} \\ c_{(2,1)} & c_{(2,2)} & \cdots & c_{(2,m)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{(k,1)} & c_{(k,2)} & \cdots & c_{(k,m)} \end{array}$$

を利用して計算できるならば, 次式で x_n を計算できることになる.

$$x_n = \sum_{j=1}^{m} c_{(0,j)} x_{n-j} + \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{m} c_{(i,j)} A^{i-1} r_{n-j}.$$

同様にして, 残差ベクトルは

$$\begin{aligned} r_n &= \sum_{j=1}^{m} c_{(0,j)} r_{n-j} + \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{m} c_{(i,j)} A^{i} r_{n-j} + f_n \\ f_n &= b - \sum_{j=1}^{m} c_{(0,j)} b \end{aligned}$$

と表せ, これは階数 m の漸化式として次のように記述できる.

$$r_n = P_{(1)}(A) r_{n-1} + P_{(2)}(A) r_{n-2} + \ldots + P_{(m)}(A) r_{n-m} + f_n$$

この係数は, 行列 A で評価される次のような k 次の多項式で決定することができる.

$$P_{(j)}(X) = c_{(0,j)} - c_{(1,j)} X - c_{(2,j)} X^2 - \ldots - c_{(k,j)} X^k$$

これらの事柄を使用することから, Grcar [6] によってこのような算法のクラスを次数が k で階数 m の OC 法と命名された. もし, $c_{(0,1)} + c_{(0,2)} + \ldots + c_{(0,m)} = 1$ ならば, $f_n = 0$ となり, 残差ベクトルは同次な漸化式を満足することになる.

OC 法には, 同次, 非同次の場合があるが, 同次の場合には残差ベクトルも初期残差ベクトルから漸化式を利用して計算することができる.

$$r_n = P_{n,1}(A) r_0 + P_{n,2}(A) r_{-1} + P_{n,3}(A) r_{-2} + \ldots + P_{n,m}(A) r_{1-m}$$

なお, $P_{n,j}(X)$ は, 次の漸化式から計算することができる.

$$P_{n,j} = P_{(1)} P_{n-1,j} + P_{(2)} P_{n-2,j} + \ldots + P_{(m)} P_{n-m,j}$$

ただし, $P_{1-j,j} = 1$ であり, この他のものはゼロである. 残差ベクトル r_n はこの漸化式を利用して計算することができるのだが, 数値的な安定性は $X = A$ のときにのみ成立する.

3 OC 法の実装

残差ベクトルのユークリッド・ノルムを最小にする非同次な OC(k, m) 法は, 次のように述べることができる. 近似解 x_nを $x_n = V_n c_n$と表すものとすれば, c_n は次のような最小二乗問題

$$\text{minimize } \|b - AV_n c_n\|_2 \tag{3}$$

を解くことで決定することになる. ただし, 行列 V_n の各列は選択空間の基底である. 一般的な基底は,

$$\text{span}\{V_n\} = \text{span}\left\{\begin{array}{cccc} x_{n-1} & x_{n-2} & \cdots & x_{n-m} \\ r_{n-1} & r_{n-2} & \cdots & r_{n-m} \\ Ar_{n-1} & Ar_{n-2} & \cdots & Ar_{n-m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A^{k-1}r_{n-1} & A^{k-1}r_{n-2} & \cdots & A^{k-1}r_{n-m} \end{array}\right\} \tag{4}$$

という数式で記述することができる.

どんな OC 法を実行するとしても, 以下の三つの選択を行なう必要がある.

(1) 選択空間に対する基底を選ぶ. この基底は行列 V_n の列となる.

(2) 最小二乗法に対する基底を選ぶ, この基底は行列 AV_n の列となる.

(3) 最小二乗問題 (3) を解く.

これらの選択の実行が, 数値的な精度や計算の効率に重要な要因となる. 数値的な精度をあげるもっとも重要な要因は, 正確な基底の計算と, いかに最小二乗問題の解が正確に計算できるかにかかっている. すなわち, 最小二乗問題の解の計算では, 正規方程式を解くのではなく, Householder 変換を利用した特異値分解がいかにうまくゆくかどうかが, OC 法の重要なかなめを担っていることになる.

なお, OC 法の実装に関するさまざまなアイディアは, Ashby et. al. [2], Saad [10, 12], Walker [15, 16] に記述されているので参考にしてほしい.

4 おわりに

OC(k, m) 法のアウトラインについて述べてきた. 実際には, GCR($k-1$)/GMRES(k) 法や ORTHOMIN(m) を使って OC 法の実装が行なわれていることは言うまでもない. 理論的には大きな次数 k や階数 m を取ることが可能だが, 現実にはそれほど大きな値をとることはできないように思われる.

なお, OC(k, m) 法は, 近似解 x_nの構成に大規模な密で非正則な憂決定系 (overdetermined) の最小二乗問題を繰り返して解く必要がある. これらの計算は, 数値計算の基本的なライブラリーを利用することができることも事実である.

参考文献

[1] W. E. Arnoldi, *The principal of Minimized Iterations in the Solution of the Matrix Eigenvalue Problem*, Quarterly of Applied Mathematics, **9**: 17-29 (1951).

[2] F. S. Ashby, T. A. Manteuffel and P. E. Saylor, *A taxonomy for conjugate gradient methods*, SIAM Journal on Numerical Analysis **27**: 1542-1568 (1990).

[3] P. Concus and G. H. Golub, *A generalized conjugate gradient method for nonsymmetric systems of linear equation*, in R. Glowwinski and J. L. Lions, Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems **134**, Springer-Verlag, Berlin, 56-65 (1976).

[4] S. C. Eisenstat, H. Elman and M. Scultz, *Variational iterative methods for nonsymmetric systems of linear equations*, SIAM Journal on Numerical Analysis, **20**: 345-357 (1983).

[5] H. C. Elman, *Iterative methods for non-self-adjoint elliptic problems*, Elliptic Problem Solvers II, Academic Press (1994).

[6] J. F. Grcar, *Operator Coefficient Methods for Linear Equations*, Snadia Natinal Laboratories, SAND89-8691 (1989).

[7] 名取, 野寺, 大規模疎行列における反復解法, 情報処理 **28**: 1452-1459 (1987).

[8] T. Nodera, *Supercomputer oriented numerical algorithms for sparse matrix computation*, in Y. Kanada and C. K. Yuen, Trends in Supercomputing, World Scientific, Singapore, 73-87 (1989).

[9] T. Nodera, *A note on Bi-CGStab*, Proceedings of the eighteenth South African Symposium on Numerical Mathematics, 157-166 (1992).

[10] Y. Saad and M. H. Scultz, *GMRES: A generalized minimum residual algorithm for solving nonsymmetric Linear systems*, SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, **7**: 856-869 (1986).

[11] Y. Saad, *Practical use of some Krylov subspace methods for solving indefinite and nonsymmetric linear systems*, SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, **5**: 203-228 (1984).

[12] Y. Saad and M. H. Scultz, *Conjugate gradient like algorithms for solving nonsymmetric linear systems*, Mathematics of Computation, **44**: 417-424 (1985).

[13] P. Sonneveld, *CGS: a farst Lanczos type solver for nonsymmetric linear systems*, SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing **7**: 36-52 (1989).

[14] Henk A. Van Der Vorst, *Bi-CGStab: A farst and Smoothly converging variant of BI-CG for the solution of nonsymmetric linear systems*, University of Utrecht Technical Report, (1992).

[15] H. F. Walker, *Implementations of the gmres method using Householder transformations*, SIAM Journal on Numerical Analysis, **9**: 152-163 (1988).

[16] H. F. Walker, *Implementations of the gmres method*, Computer Physics Comunications, **53**: 311-320 (1989).